

0-787912

На правах рукописи



Никитина Лариса Николаевна

МЕЖДОЛИННОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ФОНОНАХ В
СВЕРХРЕШЕТКАХ $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$

специальность 01.04.10 – физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена на кафедре физики полупроводников Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Томский государственный университет» и на кафедре теоретической и экспериментальной физики Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Томский политехнический университет»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
Гриняев Сергей Николаевич

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
Тютюрев Валерий Григорьевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
Брудный Валентин Натанович

доктор физико-математических наук,
Чуприков Николай Леонович

Ведущая организация: ГОУ ВПО «Кемеровский государственный университет», (г. Кемерово)

Защита состоится 19 мая 2011 г. в 16 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.267.07 в ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634050, г.Томск, пр.Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634050, г.Томск, пр.Ленина, 34 а.

Автореферат разослан 18 апреля 2011 г.

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА КГУ



0000676979

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.267.07,
доктор физико-математических наук,
Ивонин Иван Варфоломеевич

И.В.Ивонин

Актуальность работы. Полупроводники с многодолинной зонной структурой представляют значительный интерес для разработки быстродействующих, многофункциональных электронных приборов. Поиск новых материалов в этом направлении концентрируется в основном вокруг бинарных полупроводников и их твердых растворов. В то же время искусственные сверхрешетки (SL) имеют гораздо более богатую зонную структуру с большим количеством конкурирующих минимумов, что создает благоприятные условия для проявления нелинейных эффектов типа отрицательной дифференциальной проводимости.

К настоящему времени достаточно хорошо изучены электрон – фононные процессы с участием длинноволновых фононов, вызывающих электронные переходы в пределах одной долины зонного спектра [1]. Для большинства практически важных полупроводниковых материалов имеются надежные значения внутримолекулярных констант электрон-фононного взаимодействия, полученные из эксперимента и подтвержденные расчетами в реалистических моделях [2]. Рассеяние электронов на коротковолновых фононах изучено гораздо в меньшей степени [3].

Коротковолновые фононы участвуют в рассеянии электронов между разными долинами зонного спектра, приводят к отрицательному дифференциальному сопротивлению и генерации микроволнового излучения в эффекте Ганна [4], оказываются существенными для объяснения экспериментальных результатов, относящихся к исследованию спектроскопии высокого временного разрешения [5], субпикосекундной динамики электронов, оптического поглощения, зависимости интенсивности люминесценции от времени [6]. Междолинное рассеяние приводит к токам утечки в каскадных лазерах, которые наряду с лазерами на межподзонных переходах привлекают все большее внимание из-за возможности их широкого применения в оптоэлектронике, медицинской диагностике, беспроводной телекоммуникации и др. В многослойных структурах данное рассеяние представляет также интерес в связи с проблемой туннелирования электронов с участием фононов, резонансным рамановским рассеянием и т.д. [7].

Необычные свойства гетероструктур GaAs/AlAs дают много возможностей для применений в различных приборах – фотоприемниках, светодиодах, инжекционных лазерах, транзисторах, генераторах и др. Большой интерес представляют сверхрешетки $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ (001), обладающие практически совершенными гетерограницами. Для интерпретации и моделирования их физических свойств необходимо знать параметры, характеризующие электронные и фононные состояния, а также процессы их взаимодействий. Междолинные деформационные потенциалы, определяющие интенсивность рассеяния электронов на коротковолновых фононах, являются одними из наиболее важных, но недостаточно изученных параметров материалов. Для бинарных кристаллов $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ теоретические исследования деформационных потенциалов ограничивались рассмотрением лишь отдельных каналов рассеяния в рамках метода замороженных фононов, экспериментальные результаты для них не полны и противоречивы. Что касается сверхрешеток, то для них изучение электрон-фононного взаимодействия проводилось лишь для междолинных переходов типа Г-Х в рамках метода огибающей волновой функции [7]. Ab-initio исследования процессов рассеяния электронов на коротковолновых фононах для сверхрешеток до сих пор не проводились.

Цель работы: Теоретическое исследование междолинного рассеяния электронов на коротковолновых фононах в соединениях $A^{III}B^V$ и сверхрешетках $(GaAs)_m(AlAs)_n$ (001).

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1 Провести исследование рассеяния электронов на коротковолновых фононах в бинарных полупроводниках $A^{III}B^V$ и ультратонких сверхрешетках $(GaAs)_m(AlAs)_n$ на основе первопринципных расчетов электронной структуры и фононного спектра.

2 Оценить возможность применения эмпирических псевдопотенциалов и феноменологической модели сил связи для описания электронных и колебательных состояний сверхрешеток $(GaAs)_m(AlAs)_n$ (001).

3 Установить закономерности междолинного рассеяния электронов на коротковолновых и длинноволновых фононах в ряду ультратонких сверхрешеток $(GaAs)_m(AlAs)_n$ (001).

4 Изучить роль интерфейсных и локализованных колебаний атомов в процессах междолинного рассеяния электронов в сверхрешетках $(GaAs)_m(AlAs)_n$ (001).

Научная новизна работы:

1. Для бинарных полупроводников $A^{III}B^V$ проведен систематический анализ процессов рассеяния электронов в зоне проводимости на коротковолновых фононах на основе самосогласованного расчета из первых принципов в рамках метода функционала электронной плотности (DFT). Рассчитаны деформационные потенциалы для актуальных переходов $\Gamma-\bar{X}$, $\Gamma-\bar{L}$, $\bar{X}-\bar{L}$, $\bar{X}-\bar{X}$ и $\bar{L}-\bar{L}$ (далее снизу подчеркнуты сфералитные состояния) в зоне проводимости кристаллов AlP, AlAs, AlSb, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb со структурой сфалерита.

2. На основе первопринципных и полуэмпирических методов проведены расчеты вероятностей рассеяния электронов на коротковолновых фононах в зоне проводимости ультратонких SL $(GaAs)_n(AlAs)_1$, $(GaAs)_2(AlAs)_2$, $(GaAs)_1(AlAs)_3$.

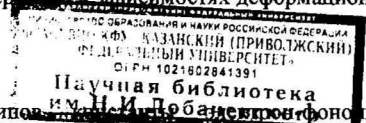
3. Изучены закономерности междолинного рассеяния электронов на фононах в ряду SL $(GaAs)_m(AlAs)_n$ и соответствующих им твердых растворах. Проведен анализ квантоворазмерных эффектов в электронных и фононных состояниях SL и зависимостей деформационных потенциалов от состава и толщины слоев SL.

4. Исследованы междолинные переходы электронов в зоне проводимости сверхрешеток $(GaAs)_m(AlAs)_n$ (001), вызванные локализованными и интерфейсными оптическими колебаниями атомов.

Научная значимость работы. Проведено систематическое ab-initio исследование констант междолинного рассеяния на коротковолновых фононах для кристаллов $A^{III}B^V$. Изучено междолинное рассеяние электронов в сверхрешетках $(GaAs)_m(AlAs)_n$ (001), установлены закономерности в зависимостях деформационных потенциалов от состава и структуры SL.

Практическая значимость работы:

1. Вычисленные из первых принципов параметры междолинного взаимодействия являются исходными параметрами, необходимыми для



моделирования оптических и транспортных свойств бинарных кристаллов и сверхрешеток на их основе.

2. Рассчитанные вероятности рассеяния электронов на коротковолновых, локализованных и интерфейсных фононах в SL $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ могут быть использованы для интерпретации и улучшения характеристик приборов на их основе.

Положения, выносимые на защиту:

1. Немонотонная зависимость деформационных потенциалов от толщины слоев в ряду сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ (001) для переходов типа Γ -X и Γ -L связана с выраженными эффектами размерного квантования в глубоких Γ квантовых ямах GaAs.

2. Наиболее интенсивное междолинное рассеяние электронов на коротковолновых фононах происходит в случае локализации волновых функций начального и конечного состояний и векторов поляризации в одних и тех же слоях сверхрешеток. В сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ величина деформационного потенциала достигает максимального значения в случае Γ -M $(\bar{x} - \bar{x})$ рассеяния на оптических колебаниях атомов Al, локализованных в двух монослоях AlAs ($n=2$).

3. Рассеяние электронов на интерфейсных фононах в нижней зоне проводимости сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ слабое и не зависит от толщины слоев.

Достоверность полученных результатов обусловлена использованием апробированных и хорошо зарекомендовавших себя методов эмпирического псевдопотенциала и DFT. Полученные результаты находятся в качественном и количественном согласии с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными. Сформулированные выводы являются взаимно согласованными и не содержат внутренних противоречий.

Личный вклад автора состоит в непосредственном выполнении расчетов электронного и фононного спектров, а также деформационных потенциалов для соединений $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ и сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ как из первых принципов, так и с использованием эмпирических подходов. Обсуждение результатов проводилось совместно с научным руководителем и консультантом. В работах, опубликованных с соавторами, автору принадлежат результаты, сформулированные в защищаемых положениях и выводах.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на Шестой Всероссийской научной конференции студентов- физиков и молодых ученых "ВНКСФ-6" (г. Томск, 2000 г.), XXXIX Международной научной студенческой конференции "Студент и научно- технический прогресс" (г. Новосибирск, 2001 г.), Российской научной студенческой конференции "Физика твердого тела" (г. Томск, 2000, 2002, 2006г.), VII Российской конференции "Арсенид галлия и полупроводниковые соединения группы III-V" (г. Томск, 2002 г.), Международной конференции "Физика электронных материалов" (г. Калуга, 2002 г.), Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике (г. Санкт-Петербург, 2002, 2008 г.), XLV Международной научной студенческой конференции "Студент и научно- технический прогресс" (г. Новосибирск, 2007 г.), 15 th International Symposium "Nanostructures: physics and technology" (г. Новосибирск, 2007 г.), XII Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Наука и образование" (г. Томск, 2008 г.), International

Conference “Nano and Giga Challenges in Electronics, Photonics and Renewable Energy”, (Ontario, Canada, 2009), 18 th International Symposium “Nanostructures: physics and technology”(г. Санкт-Петербург, 2010 г.), а также обсуждались на научных семинарах в Сибирском Физико-техническом институте при Томском государственном университете.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 20 печатных работ, из них 6 научных статей, рекомендованных ВАК.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 8 глав, основных результатов и выводов и списка литературы. Общий объем диссертации 150 страниц, в том числе 17 таблиц, 29 рисунков, список литературы включает 117 наименований.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и основные задачи исследований, указаны методы исследований, отмечена научная новизна и практическая ценность результатов работы, обоснованы достоверность полученных данных, личный вклад автора, структура диссертации, апробация и публикации результатов работы, сформулированы научные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена описанию кристаллической структуры и свойств симметрии сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ (001) с четным числом монослоев. Установлено происхождение сверхрешеточных состояний из состояний бинарных кристаллов.

Во второй главе описаны основные модели для исследования электронных свойств твердых тел. Ab initio расчеты электронного спектра бинарных кристаллов $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ и ультратонких сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ проводились с применением теории DFT и ее модификации- теории возмущений функционала электронной плотности (DFPT) [8]. Использовались сохраняющие норму псевдопотенциалы Bachelet, Hamann, Schluter [9] в приближении локальной электронной плотности (LDA) с обменом и корреляцией в форме Perdew-Zunger [10]. Расчет зонного спектра сверхрешеток с толстыми слоями проводился методом модельного эмпирического псевдопотенциала (МЭП) [12].

Третья глава содержит основные методы исследования колебательных свойств кристаллов. Здесь же описаны основные континуальные модели длинноволновых колебаний в сверхрешетках. Фононные спектры бинарных кристаллов и сверхрешеток рассчитывались с применением метода DFPT. Для анализа фононных спектров сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ использовалась модель жестких ионов в приближении дефекта масс [13].

В четвертой главе дано определение и рассмотрены способы расчета деформационных потенциалов.

Вероятность перехода электрона из блоховского состояния Ψ_{nk} долины i в состояние $\Psi_{n'k+q}$ долины j определяется как

$$W_{ji} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_s \left(\frac{|D_{ji}^s|^2}{2\rho V \omega_s(\mathbf{q})} \right) \left(N_s(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(E_{nk} \pm \hbar\omega_s(\mathbf{q}) - E_{n'k+\mathbf{q}}) \quad (1)$$

где $N_s(\mathbf{q})$ - равновесные числа фононов s -ой ветви с волновым вектором \mathbf{q} , ρ и V - плотность и объем кристалла соответственно, $\omega_s(\mathbf{q})$ - частота фонона, знак “-” соответствует испусканию, а знак “+” - поглощению фонона, дельта-функция выражает собой закон сохранения энергии, $D_{ij}^s(k, q)$ - деформационный потенциал:

$$|D_{ji}^s|^2 = \left| \sum_{\lambda} \left(\frac{M}{m_{\lambda}} \right)^{1/2} \left(\mathbf{e}^{\lambda}(s\mathbf{q}) \mathbf{d}_{n'k+\mathbf{q}, nk}^{\lambda} \right) \right|^2 \quad (2)$$

где m_{λ} - масса λ -го атома, M - масса элементарной ячейки, $\mathbf{e}^{\lambda}(s\mathbf{q})$ - вектор поляризации, $\mathbf{d}_{k+\mathbf{q}, k}^{\lambda} = \langle \Psi_{n'k+\mathbf{q}} | \nabla U_{\lambda} | \Psi_{nk} \rangle$ - векторный матричный элемент градиента атомного потенциала. Междолинный деформационный потенциал $D_{ji}^s(k, q)$ зависит от свойств электронной и фононной подсистем, его значение определяется величинами “электронного” вектора $\mathbf{d}_{k+\mathbf{q}, k}^{\lambda}$ и вектора поляризации фонона $\mathbf{e}^{\lambda}(s\mathbf{q})$, а также их взаимной ориентацией.

Ввиду большого количества фононных ветвей, сложного устройства зонного спектра и, соответственно, большого количества электрон-фононных переходов, анализ правил отбора для сверхрешеток был выполнен с использованием программы на языке аналитических вычислений Maple. В сверхрешетках колебания атомов являются, как правило, колебаниями смешанного типа, в которых представлены как продольные, так и поперечные колебания из оптических и акустических ветвей цинковой обманки. Вследствие понижения симметрии некоторые запрещенные переходы в структуре цинковой обманки становятся разрешенными в сверхрешетках.

В пятой главе представлены результаты ab-initio исследования междолинного рассеяния в кристаллах $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ в сравнении с экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Основную роль в транспортных свойствах полупроводников группы $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ играет рассеяние между Γ - минимумом зоны проводимости и минимумами, расположенными в точках X и L зоны Бриллюэна. Результаты расчетов для GaAs и AlAs приведены в качестве примера в табл.1. Самосогласованные расчеты в приближении замороженных фононов и по методу DFPT дают близкие значения деформационных потенциалов. Расчеты методом МЭП в модели жестких ионов, предполагающей сдвиг электронной плотности вместе с ионом, согласуются с ними для Γ_1 - X_1 рассеяния. В случае Γ_1 - X_3 перехода, происходящего за счет колебаний атомов V группы, МЭП расчет дает завышенное значение деформационного потенциала, поскольку деформация распределения электронов при колебаниях атома V группы более существенна, чем при колебаниях атома III группы.

Табл. 1 Междолинные деформационные потенциалы (10^8 eV/cm) для переходов

$\Gamma_1 - X_1, \Gamma_1 - X_3$ в зоне проводимости GaAs и AlAs

	Модель замороженных фононов (LDA) [11]		Модель жестких ионов (МЭП) [13]		DFPT (LDA) [8]	
	Γ_1-X_1 (LO)	Γ_1-X_3 (LA)	Γ_1-X_1 (LO)	Γ_1-X_3 (LA)	Γ_1-X_1 (LO)	Γ_1-X_3 (LA)
AlAs	6.48	0.15	5.60	0.76	6.72	0.21
GaAs	4.13	0.57	4.10	1.83	4.17	0.47

Шестая глава посвящена анализу особенностей электронного спектра сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$. Установлено происхождение сверхрешеточных состояний из состояний компонент и твердых растворов.

Зонные спектры ультратонких сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ ($m+n=4$) были вычислены, как методом функционала электронной плотности [8], так и методом эмпирического псевдопотенциала [12]. Результаты расчетов электронных уровней в симметричных точках зоны Бриллюэна согласуются друг с другом. Также хорошее согласие имеется и для волновых функций этих состояний, поэтому для систематического исследования зонной структуры сверхрешеток использовался более экономный метод эмпирического псевдопотенциала. На рис.1. представлена зонная структура сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ (SL22) вдоль симметричных линий зоны

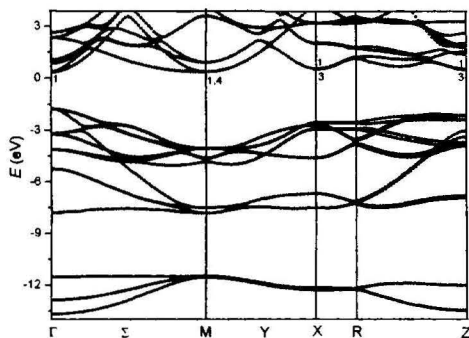


Рис.1 Зонный спектр сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$.

Бриллюэна. Нижняя зона проводимости сверхрешетки обладает сложным многодолинным характером. Близко по энергии к центральной долине Γ в зоне проводимости расположены боковые долины X, M, Z. Такие же конкурирующие долины возникают и в других рассмотренных сверхрешетках: $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ (SL31), $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ (SL13). Потолку валентной зоны во всех SL отвечает состояние с симметрией Γ_3 , дну зоны проводимости - состояние Γ_1 в сверхрешетках SL31, SL22 и состояние Γ_3 в сверхрешетке SL13. Сверхрешетка SL31 с большей долей атомов Ga является, подобно GaAs, прямозонным полупроводником, сверхрешетки SL22 и SL13 - псевдопрямозонные полупроводники. Анализ интегралов перекрытия показал, что нижние состояния зоны проводимости SL в центральных долинах Γ_1 (SL31), $\Gamma_1^{(1)}$ (SL22) и Γ_3 (SL13) происходят из состояний зоны проводимости VC Γ_1 (VC31), X_1 (VC22) и X_3 (VC13) соответственно, поэтому далее они обозначены как $\Gamma_1(\Gamma_1)$, $\Gamma_1^{(1)}(X_1)$ и $\Gamma_3(X_3)$. Второе состояние $\Gamma_1^{(2)}$ в зоне проводимости сверхрешетки SL22 возникает из Γ_1 состояния VC22.

В сверхрешетках за счет реконструкции зонного и фононного спектров, а также изменения правил отбора для междолинных переходов число каналов рассеяния электронов значительно увеличивается по сравнению с бинарными компонентами,

вследствие чего увеличивается число параметров, описывающих междолинное рассеяние. На рис.2 в качестве примера приведены уровни зоны проводимости в SL22 с указанием состояний виртуального кристалла (VC), дающих основной вклад в сверхрешеточные состояния, а также возможные междолинные переходы электронов с участием фононов.

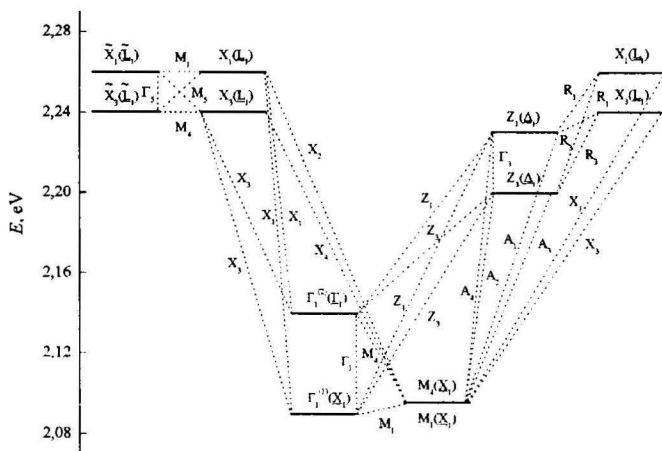


Рис.2 Схема энергетических уровней электронов в нижней зоне проводимости сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ (в абсолютной шкале энергии). Пунктирными линиями указаны возможные междолинные переходы с участием фононов.

Псевдопотенциалы [12] дают согласующиеся с экспериментом разрывы зон на гетерогранице GaAs/AlAs: из них следует, что слои GaAs выступают достаточно глубокими квантовыми ямами для Γ_1 , X_3 и L_1 состояний, а слои AlAs - сравнительно мелкими квантовыми ямами для X_1 и состояний. Поэтому эффекты размерного квантования вызывают наиболее существенные изменения в Γ_1 и (X_1, X_3) состояниях SL, являющихся аналогами Γ_1 и L_1 состояний VC соответственно. Волновые функции состояний SL локализованы в соответствующих квантовых ямах. В результате сильного смешивания на гетерограницах сверхрешеток SL31 и SL13 состояний VC из разных L_1 и L_2 долин L_1 звезды возникает большое расщепление состояний X_1 и X_3 (~0.3-0.5 eV). Подобное взаимодействие состояний VC с линией Δ вызывает появление в зоне проводимости SL новых конкурирующих долин Z_1 и Z_3 . В ряду твердых растворов зонные энергии меняются от состава почти линейно с небольшим прогибом вверх. В ряду SL похожая зависимость, но с небольшим прогибом вниз, имеет место для уровней, происходящих из сравнительно мелкой X квантовой ямы, а также средней энергии уровней X_1 и X_3 . Уровни же основных состояний в глубоких Γ и L квантовых ямах SL расположены заметно ниже уровней VC.

На рис.3 показаны зонные структуры $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_2$ и $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_4$ вдоль Г-М линии, рассчитанные с псевдопотенциалами [12], с указанием электронных переходов, вызванных интерфейсными (IF) и локализованными (LF) фононами.

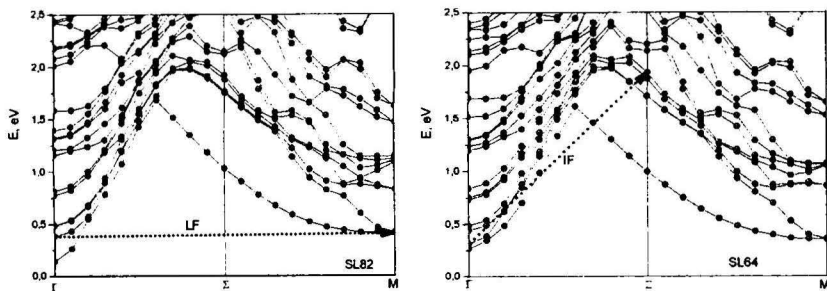


Рис. 3. Зонная структура сверхрешеток $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_2$ и $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_4$ (пунктирными стрелками обозначены электронные переходы с участием локализованных и интерфейсных фонов)

Положение зон проводимости в ряду сверхрешеток коррелирует с соответствующими уровнями виртуальных кристаллов (VC). Тетрагональная компонента сверхрешеточного потенциала приводит к понижению электронных уровней SL относительно уровней VC. Наибольшие сдвиги испытывают сверхрешеточные $\Gamma_1^{(1)}$ и M_3 состояния, локализованные в Γ и X_3 квантовых ямах GaAs. Уровни состояний M_1 , M_4 и $\Gamma_1^{(2)}$ сдвигаются слабее, поскольку они построены в основном из состояний общих анионов.

В седьмой главе исследованы колебательные свойства сверхрешеток $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$. Дано обоснование использования феноменологической модели сил связи для описания фононных спектров сверхрешеток. Проведен анализ векторов поляризации, установлена связь с колебаниями атомов в бинарных кристаллах.

Сравнение расчетов фононных спектров сверхрешеток с использованием ab-initio и эмпирических методов показало, что модель жестких ионов [14] достаточно точно описывает частоты фононов в оптической части спектра, тогда как для акустических ветвей наблюдаются отклонения $\sim 50\%$. Поскольку, однако, основной вклад (около 90%) в вероятности междолинных электронных переходов дают оптические колебания атомов, то для сверхрешеток оправдано использование

эмпирической модели жестких ионов.

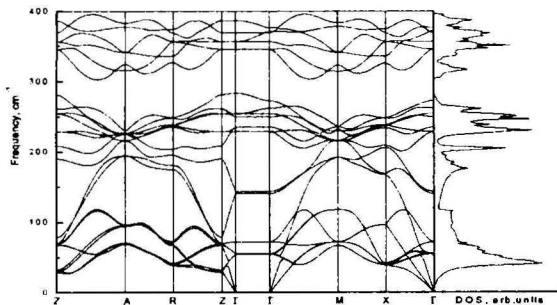


Рис.4 Фононный спектр и плотность фононных состояний сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$

На рис.4. в качестве примера приведен фононный спектр сверхрешетки $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ в модели жестких ионов вдоль линий высокой симметрии тетрагональной зоны Бриллюэна, здесь же показана плотность фононных состояний. Увеличение количества атомов в элементарной ячейке SL приводит к 4-х кратному росту числа фононных

ветвей по сравнению с бинарными кристаллами. В области оптических частот SL выделяются полосы, относящиеся к колебаниям отдельных связей Ga-As и Al-As.

Колебания атомов в сверхрешетках в основном являются колебаниями смешанного типа, в которых представлены продольные и поперечные колебания из оптических и акустических ветвей бинарных кристаллов. Фононам с симметрией M_2 отвечают колебания атомов в основном либо только катодной, либо только анионной подрешеток. В фононах с симметрией X_1 и X_3 участвуют колебания всех атомов. Приближение дефекта масс приводит к вырождению некоторых состояний в симметричных точках M , R и A . Из анализа происхождения колебаний в сверхрешетках следует, что фононы с большими частотами ($\omega(q) > 9$ THz) связаны с колебаниями легких атомов Al. Частоты фононов X_3 (7.338 THz) в SL13 и X_1 (7.438 THz) в SL22 близки к частоте продольных оптических колебаний GaAs L_1 (7.32 THz). Им отвечают колебания атомов Ga и As, прилегающих к гетерогранице GaAs/AlAs. В аналогичном фононе сверхрешетки SL31 X_3 (7.228 THz) колебания интерфейсных атомов также представлены с наибольшим весом, но за счет подмешивания поперечного оптического фонона GaAs L_3 (7.15 THz) в нем присутствуют заметные колебания атомов Ga и As внутри слоя GaAs. Фононы (M_1+M_2) в SL31 и SL13, и M_2 в SL22 происходят из продольного акустического X фонона в бинарных кристаллах с частотой 7.055 THz. Всем этим фононам отвечают колебания атомов As.

Из сравнения электронных и фононных матриц перекрытия следует, что фононные состояния бинарных кристаллов смешиваются в SL в целом сильнее, чем электронные состояния VC. Это связано с тем, что разница масс атомов Ga и Al выступает относительно более сильным возмущением к колебательным состояниям бинарных кристаллов, чем разница псевдопотенциалов ΔV - к электронным состояниям VC.

Фононные спектры сверхрешеток с толстыми слоями рассчитывались с применением феноменологической модели сил связи в приближении дефекта масс [13]. Результаты расчета для SL (GaAs)₈(AlAs)₂, (GaAs)₆(AlAs)₄ приведены на рис. 5. Оптические ветви с большими частотами ~10-12 THz связаны с колебаниями атомов Al и отделены от других ветвей щелью.

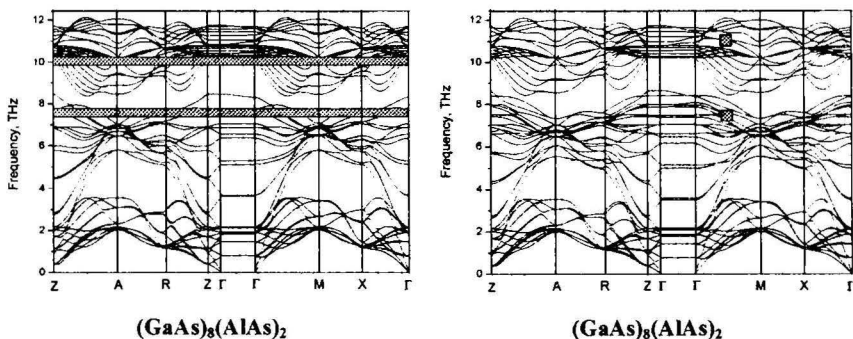


Рис.5 Фононные спектры сверхрешеток с толстыми слоями в приближении дефекта масс (выделены области локализованных и интерфейсных фононов).

Оптическим фононам с частотами в неперекрывающемся интервале частот компонент отвечают колебания, локализованные в слоях сверхрешетки.

Данные колебания носят смешанный LO-TO характер с преимущественными смещениями катионов, амплитуда которых затухает в соседних слоях по

экспоненциальному закону с глубиной проникновения λ . Значения λ согласуются с результатами расчета комплексной фононной структуры [15].

При больших толщинах слоев сверхрешеток ($m, n \geq 4$) в “карманах” фононного спектра между акустическими и оптическими ветвями компонент возникают интерфейсные оптические фононы ($q \perp z$), которым отвечают колебания катионов вблизи гетерограниц.

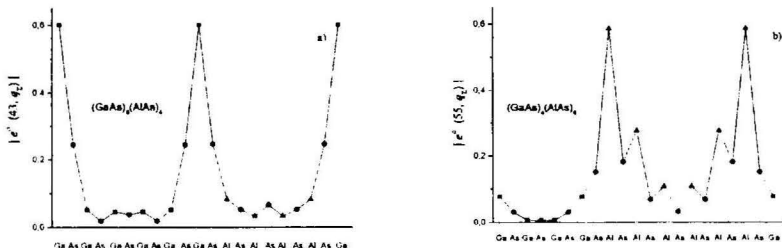


Рис.6 Модуль вектора поляризации $|e^{\alpha}(s, q)|$ интерфейсного Σ_1 фонона а) ветви с номером $s = 43$ и частотой $\omega = 7,402$ THz сверхрешетки $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_4$, б) ветви с номером $s = 55$ и частотой $\omega = 11,075$ THz сверхрешетки $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_6$.

На рис.6 показаны модули векторов поляризации $e^{\alpha}(s, q_z)$ интерфейсного фонона TO- типа ($\omega(q_{\Sigma}) = 7,402$ THz) в сверхрешетке $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_4$ и интерфейсного фонона LO- типа ($\omega(q_{\Sigma}) = 11,075$ THz) в сверхрешетке $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_6$. В использованном приближении дефекта масс такие фононы возникают при волновом векторе с середины линии Σ зоны Бриллюэна: $q_{\Sigma} = (\pi/a_0, 0, 0)$. Фононы TO- типа сопровождаются колебаниями атомов Ga в направлении $[011]$, фононам LO- типа отвечают колебания атомов Al в направлении $[211]$.

В восьмой главе представлены результаты расчета междолинных деформационных потенциалов в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$. Установлены закономерности деформационных потенциалов для различных каналов рассеяния в ряду сверхрешеток. Изучена роль локализованных в слоях и интерфейсных фононов в междолинных электронных переходах.

Междолинные деформационные потенциалы довольно “чувствительны” к детальному виду волновых функций и векторов поляризации, поэтому их значения для отдельных каналов рассеяния, полученные первопринципными и феноменологическими методами, заметно отличаются друг от друга. Поскольку, однако, наблюдаемая вероятность перехода электрона из одной долины в другую определяется суммарным вкладом от всех фононов, то целесообразно провести сравнение объединенных по фононам деформационных потенциалов

$$\langle D_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \rangle = \sqrt{\sum_j |D'_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'}|^2}. \text{ Такие деформационные потенциалы для наиболее актуальных}$$

каналов рассеяния в ультратонких сверхрешетках $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$, $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$, $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ приведены в табл.2. Видно, что полученные значения в целом достаточно хорошо согласуются друг с другом, поэтому детальный анализ междолинного рассеяния в сверхрешетках как с тонкими, так и с толстыми слоями проведен на основе полумпирических методов.

Табл. 2 Объединенные по фононам междолинные деформационные потенциалы

$\langle D_{nk,n'k'} \rangle$ в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ (10^8 eV/cm)

$(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$			$(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$			$(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$		
Переход	LDA	МЭП	Переход	LDA	МЭП	Переход	LDA	МЭП
$\Gamma_1\text{-M}_5$	7.25	7.57	$\Gamma_1^{(1)}\text{-M}_1$	8.87	8.53	$\Gamma_3\text{-M}_5$	7.68	7.85
$\Gamma_1\text{-X}_2$	3.89	4.53	$\Gamma_1^{(1)}\text{-X}_3$	5.16	5.44	$\Gamma_3\text{-X}_1$	7.51	6.64
$\Gamma_1\text{-X}_1$	3.33	3.82	$\Gamma_1^{(1)}\text{-X}_1$	3.63	3.95	$\Gamma_3\text{-X}_3$	2.92	2.82
$\text{X}_3\text{-}\tilde{\text{X}}_3$	1.86	1.21	$\text{X}_3\text{-}\tilde{\text{X}}_3$	1.31	1.08	$\text{X}_3\text{-}\tilde{\text{X}}_3$	1.47	1.20
$\text{X}_1\text{-}\tilde{\text{X}}_1$	1.02	0.73	$\text{X}_1\text{-}\tilde{\text{X}}_1$	1.19	0.92	$\text{X}_1\text{-}\tilde{\text{X}}_1$	0.63	0.58
$\text{X}_1\text{-}\tilde{\text{X}}_3$	1.02	0.90	$\text{X}_1\text{-}\tilde{\text{X}}_3$	1.86	1.71	$\text{X}_1\text{-}\tilde{\text{X}}_3$	1.19	0.91

На рис.7 показано изменение объединенных по фононам и усредненных по родственным электронным состояниям, происходящим из лучей одной и той же сфалеритной звезды, деформационных потенциалов SL, вычисленных согласно

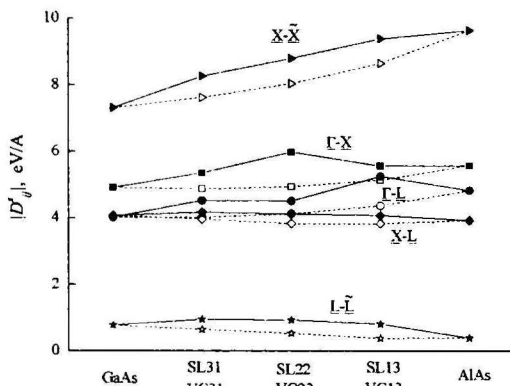


Рис.7 Усредненные междолинные деформационные потенциалы в SL в сравнении с данными для GaAs, AlAs и VC.

$$\langle D_g \rangle = \frac{\Omega_{SL}}{\Omega_g} \sqrt{\frac{\sum_{(m'n')=1}^N \sum_j |D'_{nk,n'k'}|^2}{N}}$$

(N - число лучей в звезде). Множитель $\Omega_{SL}/\Omega_g = 4$ введен для удобства сравнения с данными GaAs, AlAs и VC. На рис.7 показаны также соответствующие деформационные потенциалы твердых растворов и бинарных кристаллов. Видно, что рассеяние электронов на фононах в SL в целом интенсивнее рассеяния в твердых растворах.

Результаты анализа деформационных потенциалов сводятся к следующему:

Междолинное рассеяние $\Gamma_1\text{-M}_5$, $\Gamma_1\text{-M}_1$, $\Gamma_1\text{-M}_4$. Данные каналы рассеяния в SL являются аналогами $\Gamma\text{-X}$ рассеяния VC и поэтому, подобно ему, происходят в основном за счет колебаний катионов. Наиболее интенсивное рассеяние вызывают колебания легких атомов Al. Немонотонная зависимость, по всем видимости, связана с эффектами гибридизации электронных состояний.

Междолинное рассеяние $\Gamma_1\text{-X}_1$, $\Gamma_1\text{-X}_3$. Эти каналы рассеяния в SL выступают аналогами $\Gamma\text{-L}$ перехода VC. Главной причиной немонотонной зависимости является эффект "конфайнмента" – локализации волновой функции Γ_1 состояния в квантовой яме GaAs.

Междолинное рассеяние Γ_3 - M_5 , $\Gamma_1^{(1)}$ - M_1 , $\Gamma_1^{(1)}$ - M_4 , $M_5^{(1)}$ - $M_5^{(2)}$, M_1 - M_4 . Данные каналы рассеяния являются аналогами $\underline{X} - \tilde{X}$ рассеяния VC и связаны с колебаниями катионов. Наибольшие деформационные потенциалы отвечают переходам Γ_3 - M_5 и $M_5^{(1)}$ - $M_5^{(2)}$, вызванных оптическими колебаниями атомов Al. Вследствие подобия электронных плотностей M и $\Gamma(\underline{X})$ состояний усредненный деформационный потенциал $\underline{X} - \tilde{X}$ перехода меняется монотонно в ряду сверхрешеток.

Междолинное рассеяние $X_1 - \tilde{X}_1$, $X_1 - \tilde{X}_3$, $X_3 - \tilde{X}_3$. Эти каналы рассеяния являются аналогами $\underline{L} - \tilde{L}$ перехода VC и связаны в основном с колебаниями анионов, электронная плотность вблизи которых почти не зависит от химического состава. Поэтому усредненные потенциалы $\underline{L} - \tilde{L}$ перехода во всех SL близки.

Междолинное рассеяние с участием Z долин. Боковые долины Z_1 и Z_3 возникают в SL за счет взаимодействия состояний VC с волновыми векторами $\underline{\Delta}(0,0,0.25)$ и $\underline{\Delta}(0,0,0.75)$. Анализ волновых функций SL в точке Z показал, что основной вклад в них дает состояние VC с вектором $\underline{\Delta}(0,0,0.75)$, расположенным вблизи сфереритной точки \underline{X} . Вес такого состояния практически один и тот же во всех SL, поэтому зависимости междолинных потенциалов Γ -Z, M-Z, X-Z переходов в ряду SL и твердых растворов подобны зависимостям потенциалов Γ -X, M-X, X-X переходов.

Рассеяние электронов на локализованных в слоях сверхрешеток фононах рассматривалось для переходов между нижними Γ и M долинами зоны проводимости сверхрешеток. Деформационные потенциалы для наиболее интенсивных переходов с участием локализованных в слоях AlAs фононов приведены в табл.3.

Табл. 3 Деформационные потенциалы $|D_{n\Gamma,n'M}^s|$ Γ -M переходов электронов в зонах проводимости сверхрешеток. В скобках приведены частоты фононов (THz). Жирным шрифтом выделены потенциалы, относящиеся к локализованным в слоях AlAs оптическим фононам, другие потенциалы связаны с колебаниями атомов Ga.

Сверхрешетка	(GaAs) ₉ (AlAs) ₁	(GaAs) ₈ (AlAs) ₂	(GaAs) ₇ (AlAs) ₃
Переход	Γ_3 - M_5	$\Gamma_1^{(2)}$ - M_4	Γ_3 - M_5
$ D_{n\Gamma,n'M}^s $, eV/Å	2.95 (6.520)	2.04 (5.607)	5.30 (9.056)
	4.07 (6.781)	1.46 (6.259)	7.98 (10.518)
	4.28 (10.609)	1.69 (6.991)	4.71 (11.716)
		1.05 (7.496)	
		9.75 (9.700)	

Эти потенциалы имеют большие значения вследствие одновременной локализации электронов и фононов в одном и том же слое (AlAs) сверхрешеток. Максимальная локализация фононов имеет место для одного монослоя AlAs, однако, в этом случае "мощность" квантовой ямы \underline{X} типа недостаточна для запираания электронного состояния и поэтому константа междолинного Γ -M рассеяния относительно невелика.

Рассеяние электронов на интерфейсных фононах рассматривалось для переходов электронов из долины Γ на середину линии Σ в нижней зоне проводимости сверхрешеток. Деформационные потенциалы для Γ - Σ переходов с участием интерфейсных и других фононов даны в табл.4.

Табл. 4 Деформационные потенциалы $|D_{n\Gamma,n'\Sigma}^s|$ для Γ - Σ переходов электронов в зоне проводимости сверхрешеток. В скобках даны частоты фононов в THz. Жирным шрифтом выделены потенциалы, связанные с интерфейсными колебаниями.

	$(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_4$	$(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$	$(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_6$
Переход	$\Gamma_1^{(2)}-\Sigma_2$	$\Gamma_1^{(1)}-\Sigma_1$	$\Gamma_1^{(1)}-\Sigma_1$
$ D_{n\Gamma,n'\Sigma}^s , \text{eV/\AA}$	1.60 (4.826)	1.54 (8.887)	1.46 (4.991)
	1.46 (5.191)	1.02 (10.651)	2.09 (5.410)
	1.28 (7.402)	1.52 (11.069)	4.14 (9.618)
	2.77 (9.164)		1.73 (10.633)
	2.67 (10.205)		1.90 (11.075)
	2.91 (11.091)		2.45 (11.558)

Фононы с низкими частотами (4-5 THz) сопровождаются колебаниями атомов обеих подрешеток. В сверхрешетке $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_4$ интерфейсное рассеяние обусловлено ТО колебаниями атомов Ga, в других сверхрешетках - ЛО колебаниями атомов Al. Рассеяние на интерфейсных фононах имеет сравнительно слабую интенсивность, независимую от толщины слоев сверхрешетки.

Основные результаты и выводы

1. Для бинарных полупроводниковых кристаллов $A^{III}B^V$ проведен систематический анализ процессов рассеяния электронов в зоне проводимости на коротковолновых фононах. На основе самосогласованного расчета из первых принципов в рамках метода функционала электронной плотности с единых позиций вычислены постоянные решетки кристаллов, построена электронная зонная структура и фононные спектры кристаллов и рассчитаны вероятности рассеяния электронов на коротковолновых колебаниях решетки для актуальных междолинных переходов в зоне проводимости.

2. Из первых принципов определены зонные энергии, частоты фононов и вероятности электрон-фононных переходов для ультратонких сверхрешеток $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$, $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2$, $(\text{AlAs})_3(\text{GaAs})_1$ (001). Результаты расчета хорошо согласуются с данными, полученными полуэмпирическими методами.

3. Показано, что вследствие эффектов размерного квантования в зоне проводимости ультратонких сверхрешетках $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$, $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2$, $(\text{AlAs})_3(\text{GaAs})_1$ возникают близко расположенные конкурирующие долины, волновые функции которых локализованы в соответствующих квантовых ямах. Это приводит к росту интенсивности междолинных переходов в сверхрешетках по сравнению с аналогичными переходами в твердых растворах. Наиболее сильная локализация волновых функций имеет место в наиболее глубоких $\underline{\Gamma}$ ямах GaAs, что вызывает немонотонное изменение деформационных потенциалов переходов типа $\underline{\Gamma}$ - \underline{X} и $\underline{\Gamma}$ - \underline{L} в ряду сверхрешеток. Наряду с этим, в результате гибридизации состояний из сфалеритных \underline{L} долин в сверхрешетках возникает большое расщепление X_1 и X_3 состояний, которое понижает уровень основного состояния в \underline{L} - яме и усиливает роль X-долин в электронных свойствах сверхрешеток.

4. Установлено, что междолинные переходы электронов в зоне проводимости сверхрешеток Γ_1 - M_3 , Γ_1 - X_1 , Γ_1 - X_3 , X_1 - X_1 , X_1 - X_3 , Γ_3 - M_3 происходят в основном за счет

колебаний катионов, переходы X_1-M_5 , X_3-M_5 , Γ_3-X_1 , Γ_3-X_3 – за счет колебаний анионов, а наиболее интенсивные каналы рассеяния Γ_3-M_5 и Z_3-M_5 связаны с оптическими колебаниями легких атомов Al.

5. Исследовано рассеяние электронов на коротковолновых и длинноволновых фононах в сверхрешетках $(GaAs)_m(AlAs)_n(001)$ с ультратонкими слоями ($n, m = 1, 2, 3$). Определены деформационные потенциалы для междолинных переходов электронов в зонах проводимости сверхрешеток и твердых растворов соответствующих составов.

6. Исследованы междолинные Γ -М и Γ - Σ переходы в зоне проводимости сверхрешеток $(GaAs)_m(AlAs)_n(001)$, вызванные локализованными и интерфейсными оптическими колебаниями атомов. Интенсивность Γ -М переходов возрастает с ростом доли Al вследствие увеличения электронной плотности в квантовых X – ямах. Междолинное рассеяние наиболее интенсивно, когда электронные и колебательные состояния локализованы в одних и тех же слоях сверхрешетки. Интерфейсные колебания возникают в сверхрешетках с достаточно толстыми слоями ($m, n \geq 4$) и вызывают относительно слабые по интенсивности переходы электронов из $\Gamma_1(X)$ долины в состояние нижней зоны проводимости на середине линии Σ .

Список публикаций

1. Гриняев С.Н. Междолинное рассеяние электронов на фононах в ультратонких сверхрешетках $(AlAs)_1(GaAs)_3$ / Л.Н. Никитина, В.Г. Тютерев // Физика твердого тела.- 2006.- Т.48, вып.1- С. 120-127.

2. Никитина Л.Н. Самосогласованный расчет деформационных потенциалов для междолинных переходов с участием фононов в кристаллах $A^{III}B^V$ / С.В. Обухов, В.Г. Тютерев ; редкол. "Изв. высш. учеб. заведений. Физика." – Томск, 2008. – 19 с. – Деп. в ВИНТИ 31.10.2008, № 845- В2008.

3. Никитина Л.Н. Ab initio расчет деформационных потенциалов для междолинных переходов с участием фононов в кристаллах $A^{III}B^V$ со структурой сфалерита / С.В. Обухов, В.Г. Тютерев // Изв. Вузов. Физика.- 2009.- №7.-С. 78-83.

4. Никитина Л.Н. Междолинное рассеяние электронов на фононах в кристаллах $A^{III}B^V$ / С.В. Обухов, В.Г. Тютерев // Научно-технические ведомости СПбГПУ, Физико-математические науки.- 2009.- №2(77).- С. 34-38.

5. Гриняев С.Н. Междолинное рассеяние электронов на фононах в ультратонких сверхрешетках $(GaAs)_m(AlAs)_n(001)$ / Л.Н. Никитина, В.Г. Тютерев ; редкол. "Изв. выпш. учеб. заведений. Физика." – Томск, 2009. – 30 с. – Деп. в ВИНТИ 30.10.2009 № 670- В2009.

6. Гриняев С.Н. Междолинное рассеяние электронов на фононах в ультратонких сверхрешетках $(GaAs)_m(AlAs)_n(001)$ / Л.Н. Никитина, В.Г. Тютерев // Физика твердого тела.- 2010.- Т.52, вып.8- С. 1498- 1504.

7. Бычкова Л.Н. Электронная структура ультратонких сверхрешеток// Шестая Всероссийская научная конференция студентов- физиков и молодых ученых (ВНКСФ-6): Тез. докл.: в 1 т. Т. 1- Екатеринбург-Томск, изд. АСФ России, 2000. С. 100-101.

8. Бычкова Л.Н. Электронная структура и деформационные потенциалы ультратонких сверхрешеток // Физика твердого тела: материалы VII Рос. науч. студ. конф., 16-18 мая 2000 г.: Томск: изд. ТГУ, 2000.- С. 86-87.

9. Бычкова Л.Н. Междолинное рассеяние электронов в ультратонкой сверхрешетке $(AlAs)_1(GaAs)_3$. // Студент и научно- технический прогресс: материалы XXXIX межд. науч. студ. конф., 9-13 апреля 2001 г.: Новосибирск: изд. НГУ, 2001.- С. 65-66.

10. Бычкова Л.Н. Деформационные потенциалы в сверхрешетке $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$ // Физика твердого тела: материалы VIII Рос. науч. студ. конф., 14-16 мая 2002 г.: Томск: изд. ТГУ, 2002.- С. 67-68.
11. Бычкова Л.Н., Гриняев С.Н., Тютюрев В.Г. Междолинное рассеяние электронов на фононах в ультратонких сверхрешетках $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_m$ // Арсенид галлия и полупроводниковые соединения группы III-V: материалы VIII Рос. конф., 1-4 октября 2002 г.: Томск: изд. ТГУ, 2002.- С. 104-105.
12. Бычкова Л.Н., Гриняев С.Н., Тютюрев В.Г. Электрон-фононное взаимодействие в сверхрешетках $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_m$ // Международная конференция "Физика электронных материалов": материалы конф., 1-4 октября 2002 г.: Калуга: изд. КГПУ, 2002.- С.272-273.
13. Бычкова Л.Н., Гриняев С.Н., Тютюрев В.Г. Особенности междолинного рассеяния на коротковолновых фононах в ультратонких сверхрешетках $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_m$ // Четвертая Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике: Тез. докл.: в 1 т. Т. 1. - Санкт-Петербург, изд. СПбГПУ, 2002.- С.48-49.
14. Никитина Л.Н. Закономерности междолинного рассеяния в ультратонких сверхрешетках $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_m$ // Физика твердого тела: материалы X Рос. науч. студ. конф., 4-6 мая 2006 г.: Томск: изд. ТГУ, 2006.- С. 93-94.
15. Никитина Л.Н. Междолинные деформационные потенциалы в сверхрешетках $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$ (001) // Студент и научно-технический прогресс: материалы XLV межд. науч. студ. конф., 10-12 апреля 2007 г.: Новосибирск: изд. НГУ, 2001.- С. 115-116.
16. Grinyaev S.N., Nikitina L.N., Tyuterev V.G. Intervalley deformation potentials in $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_m(001)$ superlattices // Proc. of 15 th International Symposium "Nanostructures: physics and technology".- Novosibirsk.- 2007.- P. 551-555.
17. Обухов С.В., Никитина Л.Н. Рассеяние электронов на коротковолновых фононах в полупроводниках группы A_3B_5 // XII Всероссийская конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Наука и образование": Тез. докл.: в 1 т. Т. 1.- Томск, изд. ТГПУ, 2008.- С. 64-65.
18. Обухов С.В., Никитина Л.Н. Ab initio расчет деформационных потенциалов для междолинных переходов с участием фононов в кристаллах $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ со структурой сфалерита // X Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур. полупроводниковой опто- и наноэлектронике: Тез. докл.: в 1 т. Т. 1. - Санкт-Петербург, изд. СПбГПУ, 2008.- С.106-107.
19. Tyuterev V.G., Vast N., Sjakste J., Obukhov S.V., Nikitina L.N. Electron-Short Wave Phonon Interaction Parameters in Semiconductors and Structures from Density Functional Theory// Proc. of Int. Conf. "Nano and Giga Challenges in Electronics, Photonics and Renewable Energy".- Ontario, Canada.- 2009.- P. 302-303.
20. Grinyaev S.N., Nikitina L.N., Tyuterev V.G. Intervalley scattering of electrons by confined and interface optical phonons in $(\text{AlAs})_m(\text{GaAs})_n$ (001) superlattices// Proc. of 18 th International Symposium "Nanostructures: physics and technology".- St. Petersburg.- 2010.- P. 158-159.

Список цитированной литературы

1. Ridley B.K. Quantum Processes in Semiconductors 4th Edition- Oxford Science Publications.- 1999.- p.436
2. Zollner S. Microscopic Theory of Intervalley Scattering in GaAs: k-Dependence of Intervalley Deformation Potentials/ S. Gopalan, M. Cardona // Phys. Rev.B. - 1991. - V. 44. -p.13446 – 13451.

3. Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках: Наука, ФМЛ.-1984.- 352 с..
4. Gunn B. The Gunn effect //Solid State Commun. -1963.-V.1.-P. 88-92.
5. Rossi F., Kuhn T. Theory of ultrafast phenomena in photoexcited semiconductors // Rev. Mod. Phys. -2002.-v.74.-p. 895 – 950.
6. Shah J. Determination of intervalley scattering rates in GaAs by subpicosecond luminescence spectroscopy / B. Deveaud, T.C.Damen, W.T. Tsang, A.C. Gossard, P. Lugli //Phys. Rev. Lett. -1987.-V.59.-P. 2222-2225.
7. Грибников С., Райчев О.Э.. Г-Х перенос в реальном пространстве: вклад рассеяния на междолинных фононах // ФТП.- 1989.- Т. 23.- С. 2171- 2177., Райчев Э. Особенности проводимости Г-Х сверхрешеток.// ФТП.- 1989.- т. 25.- с 1228-1236. Mlayah A. Resonant Raman scattering in GaAs/AlAs superlattices: The role of electron state mixing / R. Carles, A. Sayari, R. Chtourou, F.F. Charfi, R. Planel // Phys. Rev. B.- 1996.-V. 53. -P. 3960 -3965. Akimov A. Inelastic scattering of hot electrons in n-GaAs/AlAs types I and II multiple quantum wells doped with silicon / V.F. Sapega, D.N. Mirlin and V.M. Ustinov // Physica E .- 2001.- V. 10.- P. 505-510. Kinsler P. Interface phonons in asymmetric quantum well structures / R.W. Kelsall, P.Harrison // Superlatt. Microstruct.- 1999.- V.25.- P. 163-166.
8. Baroni S. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory / S. Gironcoli, A. Corso, P.Giannozzi // Rev.of Mod. Phys.- 2001.- V. 73.- P.515-562.
9. Bachelet G. B. Pseudopotentials that work: from H to Pu. / M. Schlüter, D.R. Hamann // Phys. Rev. B.- 1982.- V.26.- P. 4199-4228.
10. www.pwscf.org
11. Wang J.Q. Intervalley Gamma -X deformation potentials in III-V zinc-blende semiconductors by ab initio pseudopotential calculations/ Z.Q Gu, M.F. Li , WY Lai // Phys Rev B .- 1992.- V.46.- P. 12358-12364.
12. Mader K.A., Zunger A. Empirical atomic pseudopotentials for AlAs/GaAs superlattices, alloys, and nanostructures // Phys. Rev. B.- 1994.-v.50.- p. 17393-174.
13. Grinyaev S.N. Intervalley deformation potentials in (AlAs)₁(GaAs)₁ superlattice / G.F. Karavaev, V.G.Tyuterev // Physica B. - 1996.- V. 228.- P. 319-328.
14. Zollner S. Microscopic theory of intervalley scattering in GaAs: k dependence of deformation potentials and scattering rates./ S. Gopalan, M. Cardona // J.Appl.Phys.- 1990.- V.68.-P.1682-1685.
15. Colvard C. Folded acoustic and quantized optic phonons in (GaAl)As superlattices./ T.A. Gant, M.V. Klein // Phys. Rev. B.- 1985.- V. 31.- P. 2080-2091.

Подписано к печати 14.04.11. Бумага офсетная.
Печать RISO. Формат 60x84/16. Тираж 100 экз. Заказ № 38-0375
Центр ризографии и копирования. Ч/П Тисленко О.В.
Св-во №14.263 от 21.01.2002 г., пр. Ленина, 41, оф. № 7а.